

РАСШИРЕНИЕ БАЗЫ ДАННЫХ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ КОДА MONACO ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРЕБИОТИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ

Решение вопросов о происхождении звезд, планетных систем и жизни во Вселенной — одна из фундаментальных задач современной науки. Изучение молекулярного состава межзвездной среды, в том числе посредством моделирования эволюции химического состава, способствует построению наиболее полной картины процесса образования звезд и планетных систем.

MONACO — код, предназначенный для численного моделирования химии межзвездной среды с учетом реакций в газе и на пылевых частицах. База данных химических реакций MONACO содержит более 650 молекул, включая органические молекулы и порядка 6 000 реакций. Однако она не является полной, поэтому было принято решение о расширении базы данных, в частности в области пребиотической химии.

Был проведен сравнительный анализ сеток химических реакций MONACO и Р. Гэррода [1], в ходе которого были выявлены органические молекулы и реакции с ними, которые ранее отсутствовали в MONACO. Новые реакции были включены в базу данных кода MONACO, проведены тестовые расчеты сложной органической химии для условий коллапсирующей протозвезды и разогревающегося горячего ядра.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ для молодых ученых — кандидатов наук, проект МК-8005.2016.2.

Библиографические ссылки

1. Rob Garrod's Astrochemistry pages. Resources. Reaction file. — http://www.astro.cornell.edu/~rgarrod/wp-content/uploads/reactions_Science_paper.txt.